

УДК 539.2.01

© 1990

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЛППВ И ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

В. С. Степанюк, А. В. Козлов, О. В. Фарберович, А. А. Кацнельсон

На базе ЛППВ-метода реализована методика расчета электронной структуры дефектов в кристаллах. Рассчитаны электронные характеристики $3d$ -точечных примесей в меди, которые хорошо согласуются с результатами предыдущих расчетов и экспериментов. Показано, что функция Грина, построенная на ЛППВ-волновых функциях, хорошо описывает электронную структуру кристалла.

Наличие в твердых телах дефектов приводит к изменению физических свойств: удельного электрического сопротивления, теплоемкости, оптического поглощения, магнитной восприимчивости и т. д. В настоящее время неидеальные кристаллы активно исследуются [1, 2]. Теоретические основы в этой области были заложены Фриделем [3, 4] 30 лет назад и широко используются при интерпретации экспериментальных результатов. Известные методы расчета точечных дефектов — кластерный метод и метод расширенной ячейки — дают удовлетворительное описание эксперимента, однако точный учет электронной структуры матрицы затруднителен из-за влияния граничных условий. Наиболее оправданным в этом случае представляется использование формализма функции Грина, основы которого были заложены в работах И. М. Лифшица конца 30-х годов. Недавно был реализован [5, 6] и уже широко применяется [7–21] вычислительный алгоритм метода функций Грина, позволяющий точно определить электронную структуру дефектов с учетом электронной структуры матрицы. При этом чаще всего используются результаты ККР-расчета [22]. В то же время ККР-метод обладает рядом недостатков, таких как разрывность базисных волновых функций и необходимость использования сингулярных структурных констант. В настоящей работе предложена методика, позволяющая на основе одного из самых современных методов — ЛППВ-метода (линейного метода присоединенных плоских волн) — находить функцию Грина кристалла (ранее в рамках этого метода нам удалось хорошо описать электронную структуру и оптические свойства ряда соединений [23–26]). По сравнению с другими методами расчета зонной структуры (ЛМТО, ЛКАО, ПСВ, ЛККР) этот метод является более трудоемким, однако допустимых приближений в нем меньше. Учитывая, что в реализации метода [5, 6] функцию Грина идеального кристалла необходимо рассчитывать лишь один раз, можно надеяться на хорошую точность предлагаемого нами подхода в сочетании с высокой эффективностью. В данной работе определена электронная структура разбавленных сплавов меди с $3d$ -элементами.

1. Представление функции Грина кристалла

Исходя из спектрального представления функции Грина

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{\text{B. z.}} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}') / (E - E_{\mathbf{k}\lambda}) d\mathbf{k}, \quad (1)$$

где Ω_0 — объем ячейки Вигнера—Зейтца, \mathbf{r} и \mathbf{r}' — радиус-векторы, E — энергия, λ — номер зоны, \mathbf{k} — волновой вектор, B. z. обозначает зону Бриллюэна, $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$ — волновая функция электрона в кристалле, соответствующая собственному значению энергии $E_{\mathbf{k}\lambda}$, можно, как это обычно принимается в ККР-методе [27, 28], представить ее в виде разложения по решениям уравнения Шредингера в МТ-сфере $R_l^n(r; E) Y_L(\hat{\mathbf{r}})$

$$G(\mathbf{r} + \mathbf{R}^n, \mathbf{r}' + \mathbf{R}^{n'}; E) = -i\delta_{nn', k} \sum_L R_l^n(r_{<}; E) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) H_l^n(r_{>}; E) Y_L(\hat{\mathbf{r}}') + \\ + \sum_{l, l'} R_l^n(r; E) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) G_{l, l'}^{nn'}(E) R_{l'}^{n'}(r'; E) Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}'), \\ r_{>} = \max(r, r'), \quad r_{<} = \min(r, r'), \quad (2)$$

где $Y_L(\hat{\mathbf{r}})$ — сферические гармоники; $L = (l, m)$ — орбитальные квантовые числа; $\mathbf{R}^n, \mathbf{R}^{n'}$ — положение атомов; $k = \sqrt{E}$; $H_l^n(r; E) = R_l^n(r; E) + iN_l^n(r; E)$; $N_l^n(r; E)$ — нерегулярное решение радиального уравнения Шредингера; $G_{l, l'}^{nn'}(E)$ — энергозависимые коэффициенты функции Грина. Первое слагаемое представляет из себя функцию Грина для одной МТ-сферы в пустом пространстве, а второе характеризует влияние кристаллической структуры. Разложение (2) справедливо для $\mathbf{r} + \mathbf{R}^n$, лежащего в ячейке Вигнера—Зейтца n -го атома и $\mathbf{r}' + \mathbf{R}^{n'}$ в ячейке Вигнера—Зейтца n' -го атома. На границе МТ-сферы решение для внутрисферного пространства переходит в решение свободного уравнения Шредингера

$$R_l^n(r; E) = j_l(kr) - i\sqrt{E} t_l^n(E) h_l(kr), \quad H_l^n(r; E) = h_l(kr), \quad (3)$$

где $j_l(kr)$ — сферическая функция Бесселя, $t_l^n(E)$ — матрица рассеяния n -й МТ-сферы, $h_l(kr)$ — сферическая функция Ганкеля 1-го рода.

Коэффициенты функции Грина кристалла с дефектами можно выразить через коэффициенты функции Грина идеального кристалла $\hat{G}_{l, l'}^{nn'}(E)$ [6]

$$G_{l, l'}^{nn'}(E) = \hat{G}_{l, l'}^{nn'}(E) + \sum_{n'', l''} \hat{G}_{l, l''}^{nn''}(E) \Delta t_{l''}^{n''}(E) G_{l'', l'}^{n''n'}(E), \quad (4)$$

$\Delta t_{l''}^{n''}(E)$ — изменение матрицы рассеяния n'' -й МТ-сферы. (4) является матричным уравнением порядка $l_{\max} \times n_{\max}$, где l_{\max} — максимальный угловой момент, n_{\max} — количество МТ-сфер с возмущенным потенциалом ($\Delta t_l^n(E) = 0$ при $l > l_{\max}$, $n > n_{\max}$). Его решение для каждого значения E позволяет определить коэффициенты функции Грина кристалла с дефектами.

В кристаллах кубической симметрии разложение по сферическим гармоникам можно преобразовать в разложение по кубическим гармоникам. При этом, если ограничиться $l \leq r$ и $n = n'$, коэффициенты функции Грина приобретают диагональный вид по L , где $L = A_{1g}, T_{1u}, T_{2g}, E_g$ — неприводимые представления. Уравнение (4) принимает форму четырех скалярных уравнений. При учете возмущения ближайших соседей ($n \neq n'$) порядок (4) резко возрастает. Например, если рассматривать 16 s -, p -, d - и f -компонент с различными угловыми моментами и 59 ближайших соседей (в ГЦК-решетке), матрица будет иметь размер 944×944 . Теория группы позволяет разбить эту матрицу на блоки с максимальным размером 70×70 [15].

Используя полученные таким образом коэффициенты функции Грина кристалла с дефектами, легко получить локальную плотность состояний в области V_1

$$n(E) = -\frac{2}{\pi} \int_{V_T} \text{Im} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) d\mathbf{r} \quad (5)$$

и электронную плотность

$$n(\mathbf{r}) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) dE. \quad (6)$$

Для получения самосогласованной электронной плотности в данных расчетах применялась итерационная процедура, обменно-корреляционный потенциал вычислялся с использованием параметризации Воско [2*].

2. Построение функции Грина идеального кристалла

Мы исходим из представления волновых функций кристалла в ЛППВ-методе

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) &= \sum_i a_i^{\mathbf{k}\lambda} \varphi_{\mathbf{k}i}(\mathbf{r}), \\ \varphi_{\mathbf{k}i}(\mathbf{r}) &= \begin{cases} 1/\sqrt{Q_0} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), & r > R_s, \\ 4\pi R_{si}^2/\sqrt{Q_0} \exp(i\mathbf{k}_i\tau_s), \\ \sum_L i^L \Phi_L^*(k_i, r) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_L^*(\hat{\mathbf{k}}_i), & r \leq R_s, \end{cases} \\ \Phi_L^*(k_i, r) &= a_{sLi} R_{sLi}(E_{sLi}, r) + b_{sLi} \hat{R}_{sLi}(E_{sLi}, r), \end{aligned} \quad (7)$$

где $a_i^{\mathbf{k}\lambda}$ — решения секулярного уравнения ЛППВ-метода; $\mathbf{k}_i = \mathbf{k} + \mathbf{G}_i$; \mathbf{G}_i — вектор обратной решетки; R_s — радиус МТ-сферы s -го типа; τ_s — положение МТ-сферы s -го типа в элементарной ячейке; a_{sLi} , b_{sLi} — коэффициенты, определяемые из условия непрерывности волновых функций на границе МТ-сферы; $R_{sLi}(E_{sLi}, r)$ — решение радиального уравнения Шредингера в s -й МТ-сфере при энергии E_{sLi} (нормированное на единицу:

$\int_0^{R_s} r^2 dr R_{sLi}^2(E_{sLi}, r) = 1$); $\hat{R}_{sLi}(E_{sLi}, r)$ — его производная по энергии. Легко

видеть, что в отличие от ККР-метода $\Phi_L^*(k_i, r)$ зависит от энергии не явно, а через волновой вектор \mathbf{k} и индекс i . Прямая подстановка $\Phi_L^*(k_i, r)$ в (2) невозможна.

Подставив (7) в (1) и домножив (1) и (2) на решение уравнения Шредингера в МТ-сфере, после интегрирования получим

$$\begin{aligned} G_{LL'}^{nn'}(E) \alpha_{ii}^{*s}(E) \alpha_{i'i'}^{*s'} &= i \delta_{nn'} \delta_{LL'} k_i \alpha_{ii}^{*s}(E) |\alpha_{i'i'}^{*s'}(E)| + 2 R_{si}^2 R_{s'i'}^2 \frac{1}{\pi} \sum_{\lambda} \int_{\text{B. z.}} \times \\ &\times i^{L'L'} (E - E_{\mathbf{k}\lambda})^{-1} d\mathbf{k} \sum_{i,j} a_i^{\mathbf{k}\lambda} (a_j^{\mathbf{k}\lambda})^* \exp(i[\mathbf{k}_i R^n - \mathbf{k}_j R^{n'}]) \times \\ &\times \int_0^{R_s} \Phi_L^*(k_i, r) R_L^n(r; E) r^2 dr \int_0^{R_{s'}} \Phi_{L'}^{s'}(k_j, r) R_{L'}^{n'}(r; E) r^2 dr Y_L^*(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{L'}(\hat{\mathbf{k}}_j), \end{aligned} \quad (8)$$

где $\alpha_{ii}^{*s}(E)$ — коэффициенты, определяемые нормировкой (3)

$$\alpha_{ii}^{*s}(E) = \int_0^{R_s} R_L^n(r; E) R_{L'}^{n'}(r; E) r^2 dr. \quad (9)$$

Вместо $R_L^n(r; E)$ подставим линейное разложение по энергии

$$\begin{aligned} R_L^n(r; E) &= (R_{sLi}(E_{sLi}, r) + (E - E_{sLi}) \hat{R}_{sLi}(E_{sLi}, r)) \times \\ &\times [\alpha_{ii}^{*s}(E)/(1 + (E - E_{sLi})^2 N_{sLi})]^{-1/2}, \end{aligned} \quad (10)$$

$N_{s,l} = \int_0^{R_s} r^2 dr \dot{R}_{s,l}(E_{s,l}, r)$ — квадрат нормы производной решения радиального уравнения Шредингера по энергии. Наконец получим

$$\begin{aligned} \text{Im} [G_{LL'}^{m'}(E) \sqrt{a_{ll'}^{s'}(E) a_{l'l}^{s'}(E)}] &= \delta_{nn'} \delta_{ll'k} |a_{ll'}^{s'}(E)| \Theta(E) - 2R_s^2 R_{s'}^2 \times \\ &\times \sum_{\lambda} \int_{\text{B.z.}} \delta(E - E_{k\lambda}) dk i^{l-l'} \sum_{i,j} a_i^{k\lambda} (a_j^{k\lambda})^* \exp(i[k_i R^s - k_j R^{s'}]) \times \\ &\times (a_{s'li} + (E - E_{s'l}) b_{s'li} N_{s'l}) [1 + (E - E_{s'l})^2 N_{s'l}]^{-1/2} \times \\ &\times (a_{s'lj} + (E - E_{s'l'}) b_{s'lj} N_{s'l'}) [1 + (E - E_{s'l'})^2 N_{s'l'}]^{-1/2} \times \\ &\times Y_l^m(\mathbf{k}_i) Y_{l'}^m(\mathbf{k}_j). \end{aligned} \quad (11)$$

Для вычисления мнимой части функции Грина использовалось выражение (11). Самосогласованный потенциал для меди был получен ЛППВ-мето-

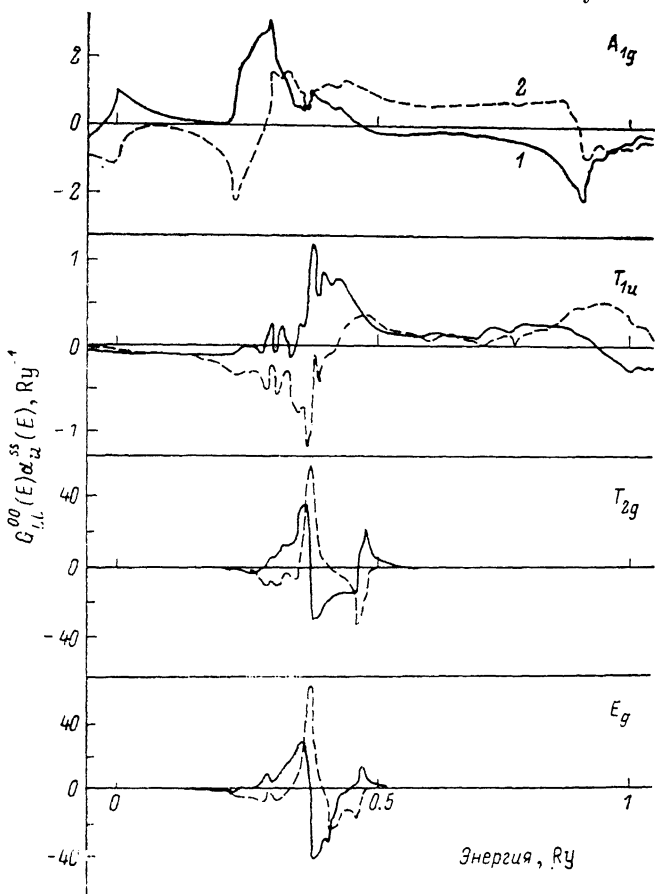


Рис. 1. Действительная (1) и мнимая (2) части коэффициентов функции Грина кристалла меди.

дом. Самосогласование производилось по 89 точкам неприводимой части зоны Бриллюэна. Критерием самосогласованности являлась стабилизация собственных значений энергии с точностью 2 мРид и электронной плотности с максимальной ошибкой 0.5%. Энергия Ферми оказалась равной 0.605 Рид, плотность состояний на уровне Ферми — 4.2 сост./Рид × ячейка. Интегрирование в (11) проводилось методом тетраэдров с квадратичной интерполяцией. Структура, связанная с *d*-электронами, обусловила выбор достаточно малого шага по энергии — 1 мРид.

Практически во всех методах расчета зонной структуры набор базисных волновых функций является неполным

$$\Psi_{k\lambda}(\mathbf{r}) = \hat{P}\Psi_{k\lambda}(\mathbf{r}), \quad (12)$$

где \hat{P} — проекционный оператор, $\Psi_{k\lambda}(\mathbf{r})$ — точные одноэлектронные волновые функции кристалла. Критерием правильности расчетов может служить выполнение правила сумм [30] или некоторых других априорных соотношений [31]. Равенство (11) с достаточной точностью определяет коэффициенты функции Грина (2), если базис ЛППВ-функций достаточно полный. Можно ожидать, что при переходе от ЛППВ-базиса к ККР-базису ошибка будет небольшой [32, 33]. Критерием правильности определения мнимой части функции Грина являлось совпадение плотности состояний (5) с полученной ЛППВ-методом и другими расчетами [22]. Локальные парциальные заряды в МТ-сфере равны для s -, p - и d -электронов соответственно 0.516, 0.493 и 9.334 в ЛППВ-методе и 0.542, 0.492 и 9.334 по формуле (6).

Действительная часть функции Грина находилась с помощью преобразования Крамерса—Кронига

$$\text{Re } G_{LL'}^{nn'}(E) \alpha_{ll'}^{n'n}(E) = - (1/\pi) \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im } G_{LL'}^{nn'}(E') \alpha_{ll'}^{n'n}(E') / (E - E') dE'. \quad (13)$$

Выбор шага и энергии обрезания (2.5 Рид), до которой считается интеграл (13), приводит к большому числу точек. Обычные методы вычисления преобразования Крамерса—Кронига требуют значительных затрат машинного времени. Действительная часть функции Грина вычислялась методом, основанным на свойствах преобразования Гильберта [34], с помощью быстрого Фурье-преобразования. Данный метод позволяет свести время вычисления (13) до нескольких секунд машинного времени на ЕС-1066. Мнимые и действительные части коэффициентов функции Грина кристалла меди показаны на рис. 1. Ошибка, связанная с обрыванием интеграла (13) на 2.5 Рид, пренебрежимо мала для d -компонент функции Грина, а для A_{1g} - и T_{1u} -компонент не превышает 0.005 Рид^{-1} .

3. Результаты расчета электронной структуры $3d$ -примесей

Был проведен расчет электронной структуры точечных примесей Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co и Ni в меди в парамагнитном состоянии. В качестве начального приближения использовалась атомная электронная плотность, рассчитанная методом Германа—Скиллмана. Самосогласование считалось законченным, если ошибка электронной плотности не превышала 0.1 %, что в наших расчетах соответствовало среднеквадратичной ошибке 10^{-3} электрона в МТ-сфере дефекта. Основные состояния пересчитывались на каждой итерации; таким образом, в расчет включены эффекты релаксации основных состояний. Было показано, что результат не зависит от выбора начального приближения.

Таблица 1

Изменение электронного заряда $\Delta N_{эл}$, сдвиг Ллойда ΔN_L и обобщенные фазовые сдвиги η_L для точечных примесей в меди

	ΔZ	$\Delta N_{эл}$	ΔN_L	η_L			
				A_{1g}	T_{1u}	T_{2g}	E_g
Sc	-8	-8.52	-8.82	-0.40	-0.32	-2.45	-2.58
Ti	-7	-7.45	-7.62	-0.30	-0.23	-2.11	-2.33
V	-6	-6.35	-6.42	-0.24	-0.17	-1.75	-2.05
Cr	-5	-5.25	-5.29	-0.20	-0.13	-1.42	-1.37
Mn	-4	-4.16	-4.20	-0.16	-0.10	-1.12	-1.38
Fe	-3	-3.08	-3.14	-0.14	-0.08	-0.85	-1.01
Co	-2	-2.01	-2.11	-0.11	-0.07	-0.57	-0.64
Ni	-1	-0.96	-1.08	-0.08	-0.05	-0.29	-0.30

Для сферически-симметричного потенциала в самосогласованном расчете должно выполняться правило сумм [35-37]

$$\Delta N_{э.л} = \Delta N_L = (2/\pi) \sum_L \eta_L(E_F),$$

$$\eta_L(E_S) = \delta_L(E_F) - \delta_L^0(E_F) + \text{Im} \ln |(1 - G\Delta t)^{-1}|_{L,L}, \quad (14)$$

где $\delta_L(E_F)$ — фазовый сдвиг потенциала дефекта, $\delta_L^0(E_F)$ — фазовый сдвиг потенциала матрицы. Изменение электронного заряда $\Delta N_{э.л}$, сдвиг Ллойда ΔN_L , а также обобщенные фазовые сдвиги $\eta_L(E_F)$ представлены в табл. 1. Небольшое смещение виртуального d -состояния должно вызвать большое

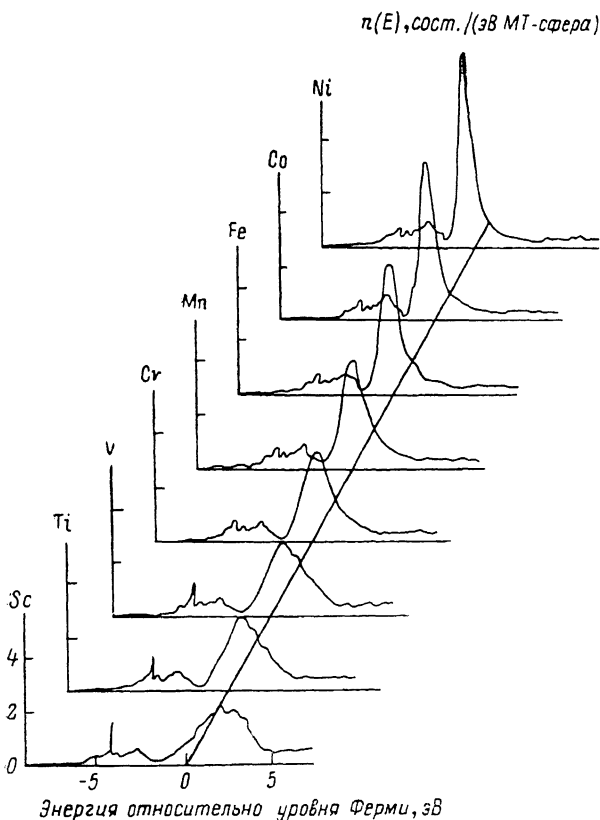


Рис. 2. Локальные плотности состояний в МТ-сфере дефекта для различных примесей.

изменение фазового сдвига, но малое изменение зарядового состояния дефекта. В этом смысле выполнение правила сумм (14) с точностью 0.1—0.3 электрона является достаточно хорошим результатом.

В данном методе возмущенным считается лишь потенциал МТ-сферы дефекта, т. е. примесь должна полностью экранироваться в пределах этой сферы. Из табл. 1 видно, что это хорошо выполняется для малых ΔZ и хуже для больших.

Положение виртуального связанного состояния относительно уровня Ферми (рис. 2) равно 2.2, 0.7, 0.4, 0.0, -0.2, -0.4, -0.6, -1.0 для Sc, . . . , Ni соответственно и согласуется с [6]. Экспериментальные результаты по оптическому поглощению дают для примеси никеля положение виртуального связанного состояния -0.75 эВ [38], а по фотоэмиссии - -0.95 эВ [39].

В табл. 2 представлены рассчитанные по формуле [40]

$$\rho/c = (4\pi\hbar/e^2k_F) \sum_l (l+1) \sin^2[\eta_{l+1}(E_F) - \eta_l(E_F)], \quad (15)$$

значения остаточного сопротивления примесей, результаты предыдущих теоретических работ и экспериментальные результаты. В [41, 42] самосогласование достигалось жестким сдвигом потенциала на некоторую величину Δ , что соответствует распределению поверхностного заряда на границе МТ-сферы. Критерием самосогласования являлось точное выполнение правила сумм (14). Зависимость остаточного сопротивления для парамагнитных $3d$ -примесей имеет вид кривой с максимумом и приближенно описывается формулой $20\pi h/e^2 k_F \sin^2(\pi \Delta Z/10)$. Небольшая асимметрия связана с учетом s - и p -фазовых сдвигов. Полное самосогласование позволяет передать эту зависимость не только качественно, но и количественно

Таблица 2

Остаточное сопротивление точечных примесей в меди, мКОм·см/ат.-%

	Расчет	[41]	[42]	[43]	Эксперимент
Sc	8.5				
Ti	12.9	15.6	16.2	14.0	16 [43], 10 [44], 10.3* [44]
V	16.6	17.4			18.4* [44]
Cr	17.4	17.8	18.1		19.5* [44], 20* [45]
Mn	15.1	15.5	14.5		17.8* [41]
Fe	10.5	10.9	10.8		12.5* [44], 14.5* [46]
Co	5.2	5.6		3.8	6.9 [43], 6.8 [44], 3.2 [47]
Ni	1.3	1.4	1.3	0.7	1.1 [43], 1.1 [44], 1.7 [47]

* Экспериментальные значения для низких температур.

Итак, развита, реализована и апробирована методика, позволяющая на основе ЛППВ-метода получать функцию Грина кристалла и кристалла с дефектами. Используются формализм метода функционала плотности и МТ-приближение потенциала. Результатом расчета являются самосогласованная электронная плотность и локальная плотность состояний. Хорошее согласие с предыдущими работами и экспериментальными данными позволяет сделать утверждение о пригодности функции Грина, построенной на ЛППВ волновых функциях, для описания электронной структуры кристалла.

Список литературы

- [1] Эренрайх Г., Шварц Л. Электронная структура сплавов. М.: Мир, 1979. 200 с.
- [2] Немощкаленко В. В., Кучеренко Ю. Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1986. 296 с.
- [3] Friedel J. // Nuovo Cimento. Suppl. 1956. V. 7. N 2. P. 287—311.
- [4] Anderson P. W. // Phys. Rev. 1961. V. 124. N 1. P. 41—53.
- [5] Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. N 22. P. 1713—1716.
- [6] Podloucky R., Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. N 2. P. 5777—5790.
- [7] Podloucky R., Deutz J., Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. St. Sol. B. 1981. V. 112. N 2. P. 515—524.
- [8] Zeller R., Braspennig B. J. // Sol. St. Comm. 1982. V. 42. N 10. P. 701—704.
- [9] Fraspennig B. J., Zeller R., Lodder A., Dederichs P. H. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. N 2. P. 703—718.
- [10] Dederichs P. H., Zeller R., Akai H., Blugel S., Oswald A. // Phil. Mag. B. 1985. V. 51. N 2. P. 137—150.
- [11] Oswald A., Zeller R., Braspennig B. J., Dederichs P. H. // J. Phys. F. 1985. V. 15. N 1. P. 193—212.
- [12] Akai H., Akai M., Blugel S., Zeller R., Dederichs P. H. // J. Magn. & Magn. Mater. 1985. V. 54—57. N 3. P. 1247—1248.
- [13] Oswald A., Zeller R., Dederichs P. H. // J. Magn. & Magn. Mater. 1986. V. 54—57. N 3. P. 1247—1248.
- [14] Blugel S., Akai H., Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 7. P. 3271—3283.
- [15] Stefanou N., Zeller R., Oswald A., Dederichs P. H. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 13. P. 6911—6912.

- [16] Stefanou N., Zeller R., Dederichs P. H. // Sol. St. Comm. 1987. V. 59. N 7. P. 429—432.
- [17] Stefanou N., Braspennig P. J., Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. Rev. B. 1988. V. 36. N 12. P. 6372—6381.
- [18] Pickett W. E., Klein B. M. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. N 4. P. 1588—1596.
- [19] Klein B. M., Pickett W. E., Poyer L. L., Zeller R. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 11. P. 5802—5815.
- [20] Anisimov V. I., Antropov V. P., Liechtenstein A. I., Gubanov V. A., Postnikov A. V. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 10. P. 5598—5602.
- [21] Antropov V. P., Anisimov V. I., Liechtenstein A. I., Postnikov A. V. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 10. P. 5603—5605.
- [22] Morruci V. L., Janack J. F., Williams A. R. Calculated electronic properties of metals. N. Y.: Pergamon, 1978. 188 p.
- [23] Степанова Е. В., Степанюк В. С., Роголева М. Н., Фарберович О. В., Григоренко А. А., Михайлин В. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2303—2306.
- [24] Степанова Е. В., Степанюк В. С., Власов С. В., Фарберович О. В., Михайлин В. В. // Изв. вузов. 1988. Т. 31. № 7. С. 82—86.
- [25] Григоренко А. А., Степанова Е. В., Степанюк В. С., Фарберович О. В., Кацнельсон А. А., Михайлин В. В. // Вестник МГУ. 1989. Т. 30. № 1. С. 61—63.
- [26] Степанюк В. С., Григоренко А. А., Козлов А. В., Фарберович О. В., Михайлин В. В., Степанова Е. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 58—62.
- [27] Korringa J. // Physica. 1947. V. 13. P. 392—404.
- [28] Kohn W., Rostoker N. // Phys. Rev. 1954. V. 94. N 5. P. 1111—1120.
- [29] Vosko S. H., Wilk L., Nusair M. // Canad. J. Phys. 1980. V. 58. N 8. P. 1200—1211.
- [30] Smith D. V., Schiles E. // Phys. Rev. B. 1978. V. 17. N 12. P. 4689—4694.
- [31] Uspenskii Yu. A., Maksimov E. G., Rashkeev S. N., Mazin I. I. // Z. Phys. B. 1983. V. 53. N 4. P. 263—270.
- [32] Ziman J. M. // Proc. Phys. Soc. Lond. 1965. V. 86. N 550. P. 337—353.
- [33] Slater J. C. // Phys. Rev. 1966. V. 145. N 2. P. 145—162.
- [34] Брычков Ю. А., Прудников А. П. Интегральные преобразования обобщенных функций. М.: Наука 1977. 288с.
- [35] Крейн М. Г. // Матем. сб. 1953. Т. 33. № 3. С. 597—626.
- [36] Lloyd P. // Proc. Phys. Soc. Lond. 1967. V. 90. N 567. P. 207—216.
- [37] Lloyd P., Smith P. V. // Adv. Phys. 1972. V. 21. N 89. P. 69—142.
- [38] Drew H. D., Doezema R. E. // Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. N 24. P. 1581—1586.
- [39] Sieb D. H., Spicer W. E. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. N 6. P. 1676—1693.
- [40] Gupta R. P., Benedeck R. // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. N 2. P. 583—586.
- [41] Mrosan E., Lehman G. // Phys. St. Sol. B. 1976. V. 77. N 2. P. K161—K164.
- [42] Степанюк В. С., Кацнельсон А. А., Ястребов Л. И. // Металлофизика. 1985. Т. 7. № 4. С. 104—105.
- [43] Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах. М.: Мир, 1971. 470 с.
- [44] Grüner G. // Adv. Phys. 1974. V. 23. N 6. P. 941—1024.
- [45] Daybell M. D., Steyert W. A. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. P. 195—198.
- [46] Daybell M. D., Steyert W. A. // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 18. N 11. P. 398—401.
- [47] Vassel C. R. // J. Phys. Chem. Solids. 1958. V. 1. N 1. P. 90—93.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
4 мая 1989 г.
В окончательной редакции
16 октября 1989 г.